最近の統計力学(1.講義ノート,多体問題研究会(第一回)の報告)

AUTHOR(S):

久保, 亮五

1. 講義ノート

「最近の統計力学」

久保亮五

統計力学がmicro なものからmacro な観測への橋渡しをするものであるとすればそれが役割をはたす範囲は広い。

統計力学の歴史はBoltzmann, Maxwell以来既に100年になるが、第二次大戦前後までのは熱平衡状態の統計力学はGibbsのわく組みの上にうまくのつて量子統計力学が出来上り(Tolman. Fowler, Fowler-Guggenheim の教科書にみられる様に)それとは別の流れとしてgas kinetics が存在するという状況であつた。そして平衡状態の統計力学と同程度に一般性をもつ非平衡状態の統計力学をつくり上げることの必要性が意識されていた。

戦後、多体問題の流れとしてPlasma理論等を契機としてfield theorectical な方法の応用がさかんになつてきたが、これと統計力学の流れとが合わさつたのは10 年程前のことになる。

統計力学の基礎付けという問題になると依然として未解決の点が多い。

以下では現在どの様なことが問題になつているかと概観してみる。

I Equilibriumの統計力学

(1) Ergode theory

ergode theory というのは、ergodicity, 即ちtime average= ensemble average を証明することである。数学的なergode theoryはvon Neumann, Birkoff, Koopman, Halmos などにより展開されたBirkoff によるとergodicity はmetrical indecomposabilityとequivalent である。metrical indecomposabilityとはphase space が2つ以上のinvariant subspaceに分けられないという事である。数学的なergode theoryはmeasure をconserveする一般的な運動

についてこれを証明するのであるが、それは余りに一般的すぎて現状では物理に役立たない。上のmetrical indecomposabilityについても実際の力学系についてこれを証明することは困難である。（ソ連のシーナイは最近rigid sphere gasのsystemがmetrically in decomposableである事を証明した由である。）

所で我々が観測するphysical quantity やとり扱うsystemは極めて特殊なものに限られている。観測する量についていえばそれは多くの場合sum function $\sum_i f(p_i, x_i)$，$\sum_{ij} f(p_i x_i, p_j x_j)$であり、またsystemは普通同種の粒子の集まりであつて対称性が高い。この様な特殊性の上に立つたergode theorem の証明が必要である。

例えばKhinchinは$< G(0) G(t) >$が漸近的にdecay する時にはGはergode theorem を満す事を証明している。

またergode theorem を証明しようとすれば平衡状態の性質だけでなく平衡状態への接近のはやさも問題になるわけだが、これは非平衡状態の統計力学と密接に関係している。

現状のまとめとしてCopenhagen の会議におけるFarquharの言葉を引用しよう。「数学的ergode theoryはphysical solution としては不十分である。限定したphysical system についてergodicityを示す事が必要である。興味ある結果がえられてはいるが物理としては不満足である」

例えば一つの問題としてclassical とquantal と本質的な違いがあるのかないのか、あるとすればどう違うのかという事に対する答がほしい。（参考書：I. E. Farquhar, Ergodic Theory in Statistical Mechanics, Interscience 1964)

(2) Existence of thermodynanic limit
Equivalence of different ensembles

existence of thermodyramic limitとは$N/V = n =$ finite, $N \to \infty$ $V \to \infty$というlimitが存在するかという問題である。non interacting systemでは明らかであるが、相互作用のあるとき手放しではこれが存在しない事は確かである。最近二体力、classical に限つて研究が進んでいる。

(Mazur, Ruelle, Fisher 等たとえばD. Ruelle, Lectures in Theoretical Physics Univ. of Colorado vol V1, 1963, pp 93- を見よ)このlimit の存在のための十分条件としてpotential に次の条件がつけられる。①底があること。(stability) ②interaction が適当に離れたところではpositiveにならない(strong tempering) 或いはpositive になつてもよいか $\frac{1}{r^{3+\epsilon}}$ (ϵ は小さい正の数) 以下であること(weak tempering)。

例えば Fisher は i) potential $\varphi(r) \geq \frac{D_1}{r^{3+\epsilon}}$ $(r \to 0)$

ii) $|\varphi| < \frac{D_2}{r^{3+\epsilon}}$ $(r \to \infty)$ iii) $\varphi(r) \geq -\omega_0$ が

満されているとき thermodynamic limit が存在することを証明している。limit の存在のみでなく limitと微分演算の交換が可能かどうかという更に難しい問題もある。

equivalence of different ensembles とは例えばmicrocanonical ensemble と canonical ensemble が equivalent になるための条件は何かという問題がある。phase change の場合にはこの問題は簡単でない。microcanonical ensemble ではenergy の fluctuation は許されないが、canonical ensemble ではphase change の場合 fluctuation が大きくなる。

またthermodynamic limit の存在に関係して、極限をとらず最初から $N=\infty$ のsystemを扱おうという試みがある。(Verboven, Winnink) Araki-Wood の tield theory の方法を応用したものだが、どの様な意味があるかは現在のところわからない。

(3) Convergence of expansion

これはvirial展開、fugacity展開等の収斂性の問題である。fugacity展開については、パラメータが小さいときは収斂することが証明出来るが、発散の性質を数学的に吟味することは容易ではない。Ising, Hersinberg モデルでは収斂性或いはsingularityの性質はPadé approximantの方法などで相当よくしらべてはいるが厳密な証明は極めて限られた場合だけである。

(4) Liquids.

Yvon–Born–Green, Kirkaood などにより分布函数に対する積分方程式のhierachyをたててとく事が行われてきた。その近似解として3体の分布函数を2体分布函数の積で近似すれば(superposition approximation)2体分布函数についてとじた積分方程式が得られる。またこれとは多少ちがつた近似としてhypernetted chain, Percus–Yevick eq などがある。最近には有限個の粒子系においてモンテカルロ法等で数値的にradial distrihution function を計算しているが、これは上のような近似法の精度をしらべるのに役立つている。(参考書:S. A. Rice and P. Gray, The Statistical Mechanics of Simple Liquids, Interscience, 1965)

(5) Long range interaction : plasma

high density linit の様な極限に対しては厳密解が知られているがそうでない場合、classical, quantal共に厳密な解はえられていない。
例えばH^+, e の混合系でshielding とbound stateの問題も答がえられていない。

(6) Polymer

生物高分子に関係して新たに脚光をあびてきた。古くからの難問としてはたとえばexcluded volume のような問題があるが、これも最近かなりの発展を見せている(たとえばM.E.Fisher, J.Chem. Phys. 44 616 (1966)を見よ)。

(7) Phase change

近似的な話は色々出来るが厳密に解くことは困難である。近年実験の精度が上つて相転移点近くのsingularityがかなり詳しく調べられるようになつてきた。
厳密解のわかつているものには次のものがある。

(1) 2次元Ising model

比熱、magnetizationのsingularity

(susceptibility については不明)

講義ノート1．

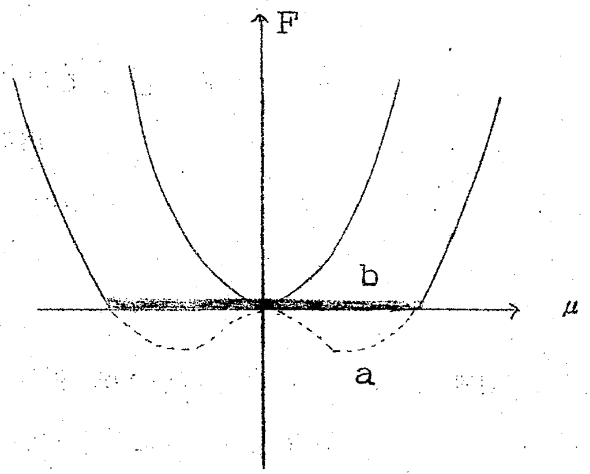
(2) van der Waals gas のmodel．(long range attractionは無限大のrange，無限小の強さの極限をとる。結晶統計などの他の例でもこのような理想化をすれば最密解は容易に得られるが、Uhlenbeck, Kac, Hemmer のvan der Waals gas はそれらよりはずつと複雑である。)

phase change のsingularityは理論、実験とも一つの中心問題であるが、熱力学的函数のsingularityも実はdynamical な量のsingularityと密接な関係にあることに注意しておきたい。

二次の相転移についてはLandauの現象論である。

$$F(M. T) = A(T) + B(T)M^2 + C(T)M^4 + \cdots\cdots$$

実験からえられているsinguarity は上の展開からえられる結論とは合つていない。今迄知られているsiagularityと上の展開との関係がどうなつているのか調べられていない。(例えばOnsager の解と上の展開との関係すら知られていない。)



更にFとMの関係はfree energyを具体的に計算する方法に依存する。homogeneityその他の強制条件をおくとaの様になるが、そうでないときはdomainが出来てbの様になるであろう。大きい系の極限でhomogenuityをどう数学的に表現するかはむつかしい。

o補足：(185頁終より7行目へ挿入) —— 断熱定理について

統計力学及び多体問題の重要な基礎であるが、多体系一般についての証明はない。

classical ではergode theoryと断熱定理とは同じだと思う。量子力学での断熱定理とergode theoryの関係は例えばVan Hoveの理論の中心にも含まれてはいるが充分明らかではない。

Ⅱ Non-equilibrium

非平衡状態のとり扱いとしては古典論での典型として気体論があつた。ここではBoltzmann equationをたててそれを解く事が行なわれてきた。しかしBoltzmann equationには成立の限界がある。それは①2体衝突に限つているがそれは果して許されるか。②考えている時間に限界がある。という様な点である。

成立の限界を考慮しつつBoltzmann equation を導くことはBogoliubovによりなされ、それに基いてmodernな gas theoryが展開される様になつた。またdensity matrix の diagonal element に対するmaster eqnation (Pauli equation) を導いたものとしてvan Hove, Prigogine らの仕事がある。ran Hoveの理論はinteractionがdiagonal singnlarity という性質をもつとき適当なtime scale でmaster eq がえられることを示したものである。Prigogine とのちがいはvon Hoveが e^{iHt} を扱いPrigogineが $e^{iH^{\times}t}$ を扱つたという点にある。

これらのderivation では前のergode theoryで直面したことが具体的に問題になつている。即ちderivation の条件として1) どの様なsystem を扱うか 2) どの様な量をobserve するか 3) 考えるtime range (or freqaency range) は何か、が問題になる。1)～3)は昔の言葉でいうとcoarse graining ということに関係している。そして2), 3)は必然的にprojection という操作を伴うのである。Liouville equation に対しobserve する量に対応したprojection をほどこす。例えばsumfunctionをobserveすると、するとprojection は一体あるいは2体のdensity matrixへのprojection ということになる。この様にprojection によりinformationの一部を消すためにstochastic equationがえられることになる。

linear responce theory の基礎的な定理としてfluctuation-dissipation theorem（広義ではadmittaceとfluctuationの間の一般的関係のことである。）が存在する。この定理は多体問題の一般論と密接な関係にある。たとえばいわゆるdielectric formulaはその一つの現れである。dielectric formulaによればequilibriumの性質はdynamical respo-

nceがわかればわかるという仕組みになっているが、これはpartition function から計算するのとはまた別な計算方式である。近頃の問題の一つはtransport の量のクラスター展開に関する発散である。参考：A.H.Kritz G.Sandri Physics Tvday 19 No. 9, 57 (1966) Bogoliubov 理論で示されたように2体衝突、3体衝突と*)実はその展開はうまくゆかない。これはdiffusion constantや粘性係数のdensity 展開にlog発散の項が現われることから問題になつてきた。もつと簡単な例として2次元でrandomに分布したdisk で粒子が散乱されるという場合(Lorentzガス) mにもdisk のdensity についてやはり同種の発散があるといわれている。
熱平衡状態ではdensity についての展開には問題がないがtransport coficientで発散が出るというこの問題については色々と検討の余地がある様に思う。(例えばpressure broadening のような動的な問題では展開は可能だと思う。)

統計力学、多体問題は形式的にも内容的にもscattering theory と関係が深い。その一つの発展はBrueckner 理論であつた。しかし最近は原子核でこれに代るものとしてseparation method などというものが用いられている由である。これは力をlong range partとshort range pange に分けるということのようであるが、そのような方法はliquidで用いられてきた。long range partはsoft であり、絶えず弱い力が沢山作用しているとしてBrownian motin 的にとり扱い、short range partはhard core 的なcollision を与えると考えてとり扱う。この方法に従つてtransport eq.をたてliquidのtranspont coefficientについてreasonable な結果がえられている。(Rice-Allcot)

次にBrownian motion についてふれる。
Mori はdynamical eq.からprojection によりgeneralized Langcvin eq.と導いた。この方法とGre en 函数の方法とはどの様な関係にあるのだろうか。これは一つの問題である。更にMori はrelaxation function を一般的に連分数に書く方法を示した

*) Boltzman eq. を形式的に拡張することは可能であるが、

$$\cfrac{\Delta_0}{i(\omega-\Omega_1)+\cfrac{\Delta_1}{i(\omega-\Omega_2)+\cfrac{\Delta_2}{\ddots}}}$$

これらの収斂性はどうなつているのであろうか。一般にsum rule expansion (moment exp)の収斂性については漸近展開と私は考えている。M. Dupuis は最近 moment expansionの収斂性と連分数の収斂性の関係を調べているが連分数の収斂性について知りたいと思う。

Brownian motion theory の別なaspectとしてnonlinear な場合、又は非平衡の定常な場合への拡張は重要であろう。laser, spin 系などでは nonlinear の問題がクローズアツプされている。このような場合にも fluctuation-dissipation theorem のある拡張が可能であり、それがある条件を与える筈であるが、これについては系統的な研究はまだあまりないと思う。最後にcritical phenomenaに関しては熱平衡量のsingularityと dynaical quantity のsingularityの間の関係がもつと追求されるべきであると思う。

詳しいreference をつける予定であつたが残念ながら時間の関係で不可能であつた。(久保)

(文責・斯波)

(詳しいreference は、2～3 号先の「物性研究」に掲載の予定です。―――――編集部註)